UNIVERSITÉ DU QUÉBEC
INRS-EAU
C.P.7500, QUÉBEC
QUÉBEC, G1V 4C7

OPTIMISATION
DES PARAMETRES
DU MODELE
CEQUEAU

par

GUY MORIN

INTRODUCTION

L'application du modèle CEQUEAU sur un bassin versant nécessite l'ajustement des paramètres pour que le modèle reproduise le mieux possible les débits observés. Avec le programme CEQUEAU [1] l'ajustement se fait par essais et erreurs, c'est-à-dire qu'on modifie les paramètres pour une simulation et on analyse les résultats, pour déterminer si l'on doit continuer à modifier les paramètres et dans quel sens. Le programme CEQUEOPT permet de trouver par optimisation la valeur de quelques paramètres du modèle, en maximisant ou minimisant une fonction objective pour reproduire les débits observés avec un minimum d'erreur.

PROGRAMME D'OPTIMISATION

L'algorithme d'optimisation (BOTM) est basé sur la méthode de M.J.D. Powell [2]. Le programme principal et un exposé de la méthode sont donnés dans "Optimization Techniques with Fortran" [3]. Le programme permet d'optimiser simultanément vingt et un (21) paramètres choisis parmi vingt-huit (28) (voir tableau 1). L'optimisation est faite avec une fonction objective choisie parmi quatre méthodes de calcul permettant une estimation de la précision des simulations. Le programme nécessite la lecture de données pour l'optimisation suivie des données du modèle CEQUEAU. Les données météorologiques et hydrométriques sont lues une première fois sur un fichier tel que préparé pour le modèle CEQUEAU (voir MORIN et al., 1981, chapitre 1). Puis, elles sont écrites en binaire sur un fichier temporaire pour accélérer le temps d'exécution. L'utilisation d'un disque virtuel pour l'écriture du fichier temporaire est recommandée pour un temps d'exécution plus court.

OPTIMISATION AVEC OU SANS CONTRAINTE

Le programme utilisé permet une optimisation sans contrainte. C'est-à-dire que les paramètres peuvent prendre n'importe quelles valeurs si elles contribuent à

minimiser la fonction objective. Prenons par exemple le seuil de température de fonte de la neige en clairière (TSD). En optimisant, le programme cherche la valeur de TSD qui minimise la fonction objective, même si la valeur de TSD n'a aucun sens physique. Le résultat obtenu permet alors de simuler les débits de la période de calibration avec un minimum d'erreur, mais sur d'autres périodes, les résultats peuvent être très différents. Si les paramètres optimisés ont des valeurs qui n'ont pas de sens physique il est nécessaire d'intervenir dans l'optimisation pour leur imposer des limites.

Le programme initial ne permettant pas une optimisation avec contrainte, on peut quand même limiter la variation des paramètres en modifiant la fonction objective. On peut aussi procéder à l'optimisation normalement dans un premier temps puis, si nécessaire, on impose une valeur aux paramètres qui ne sont pas dans les limites que l'on s'est fixées. On reprend alors l'optimisation avec les autres paramètres. Si l'on veut modifier la fonction objective, on doit donner à COFOOB sur la carte OPTIMIS1 une valeur plus grande que zéro et donner sur les cartes PAROPTxx les valeurs minimum et maximum des paramètres que l'on désire optimiser. Cette façon de procéder peut cependant entraîner des problèmes de convergence.

FONCTION OBJECTIVE

Le programme cherche à établir la valeur des paramètres en minimisant les erreurs de simulation à l'aide d'une fonction objective. Le programme permet, à l'aide de la variable NOFOB lue sur la carte OPTIMIS1, de choisir la fonction objective que l'on désire utiliser soit:

1) SOMME DES CARRÉES DES DIFFÉRENCES (NOFOB = 1):

La fonction à minimiser est obtenue en calculant la somme des carrées des différences entre les débits journaliers observés et calculés pour toute la période de simulation soit:

$$F = \sum_{j=1}^{NNE} \sum_{i=1}^{365} (QO_{ji} - QC_{ji})^2 \qquad (1)$$

où:

QO_{ji} : débits observés de l'année j et du jour i

QC_{ji} : débits calculés de l'année j et du jour i

NNE : nombre d'années simulées

i : varie de 1 à 365 ou 366

j : varie de 1 à NNE

Si la variable COFOOB lue sur la carte OPTIMIS1 est supérieure à zéro, la fonction objective est modifiée si la valeur des paramètres optimisés dépasse les limites que l'on a fixées sur les cartes PAROPTxx. La modification est faite de la façon suivante:

$$F' = F + \sum_{j=1}^{NBPAR} \text{MAX}\ [(COFOOB \times (XMIN_j - X_j)), 0.0]$$

$$+ \sum_{j=1}^{NBPAR} \text{MAX}\ [(COFOOB \times (X_j - XMAX_j)), 0.0] \qquad (2)$$

où:

F' : Fonction objective modifiée

COFOOB : Paramètre de correction de la fonction objective. Ce paramètre est lu sur la carte OPTIMIS1

XMIN : Valeur minimum du paramètre lue sur la carte OPTIMIS2

X : Valeur actuelle du paramètre optimisé

XMAX : Valeur maximum du paramètre lue sur la carte OPTIMIS2

Note: La valeur à donner au paramètre COFOOB dépend de la grandeur de la fonction F. Si COFOOB n'est pas assez grand la valeur finale du paramètre peut être en dehors des limites imposées. L'utilisation de COFOOB peut entraîner des problèmes de convergence, on peut alors, soit diminuer la valeur de COFOOB, soit ne pas optimiser le paramètre qui nuit à la convergence.

2) CRITERE NTD (NOFOB = 2):

La fonction à maximiser est obtenue en calculant le critère NTD à partir des débits observés et calculés pour toute la période de simulation. Le critère NTD a été proposé par Nash et Sutcliffe [4] et retenu par l'Organisation Météorologique Mondiale pour l'intercomparaison des modèles hydrologique [5].

$$F = \frac{\sum_{j=1}^{NNE}\sum_{i=1}^{365}(QO_{ji}-\overline{QO})^2 - \sum_{j=1}^{NNE}\sum_{i=1}^{365}(QO_{ji}-QC_{ji})^2}{\sum_{j=1}^{NNE}\sum_{i=1}^{365}(QO_{ji}-\overline{QO})^2}$$

$$F = 1 - \frac{\sum_{j=1}^{NNE}\sum_{i=1}^{365}(QO_{ji}-QC_{ji})^2}{\sum_{j=1}^{NNE}\sum_{i=1}^{365}(QO_{ji}-\overline{QO})^2} \tag{3}$$

où:

$\overline{QO}$: moyenne des débits observés

Le critère NTD varie de $-\infty$ à $+1$. Nous avons une simulation parfaite pour NTD = 1. Un NTD négatif indique qu'il est préférable d'utiliser la moyenne à long terme $\overline{QO}$. Le programme BOTM minimisant la fonction objective, on doit utiliser -F pour trouver la valeur optimale des paramètres.

Si le paramètre COFOOB lu sur la carte OPTIMIS1 est supérieur à zéro la fonction objective est modifiée si la valeur des paramètres optimisés dépasse les limites que l'on a fixées sur les cartes PAROPTxx. La modification est faite de la façon suivante:

$$F' = F - \sum_{j=1}^{NBPAR} MAX\ [(COFOOB \times (XMIN_j - X_j), 0.0]$$

$$- \sum_{j=1}^{NBPAR} MAX\ [(COFOOB \times (X_j - XMAX_j), 0.0] \quad (4)$$

où:

F' : Fonction objective modifiée

COFOOB : Paramètre de correction de la fonction objective. Ce paramètre est lu sur la carte OPTIMIS1

XMIN : Valeur minimum du paramètre lue sur la carte OPTIMIS2

X : Valeur actuelle du paramètre optimisé

XMAX : Valeur maximum du paramètre lue sur la carte OPTIMIS2

Note: La valeur de la fonction F étant généralement entre 0.0 et 1. La valeur à donner à COFOOB est d'environ 10. L'utilisation de COFOOB peut entraîner des problème de convergence, on peut alors, soit diminuer la valeur de COFOOB, où ne pas optimiser le paramètre qui nuit à la convergence.

3) SOMME DES DIFFÉRENCES ABSOLUES (NOFOB = 3):

La fonction à minimiser est obtenue en calculant la somme des différences absolues entre les débits observés et calculés pour toute la période de simulation soit:

$$F = \sum_{j=1}^{NNE} \sum_{i=1}^{365} \left|(QO_{ji} - QC_{ji})\right| \qquad (5)$$

Si le paramètre COFOOB lu sur la carte OPTIMIS1 est supérieur à zéro la fonction objective est modifiée si la valeur des paramètres optimisés dépasse les limites que l'on a fixées sur les cartes PAROPTxx. La modification est faite de la façon suivante:

$$F' = F + \sum_{j=1}^{NBPAR} MAX\ [(COFOOB \times (XMIN_j - X_j), 0.0]$$
$$+ \sum_{j=1}^{NBPAR} MAX\ [(COFOOB \times (X_j - XMAX_j), 0.0] \qquad (6)$$

où:

F' : Fonction objective modifiée

COFOOB : Paramètre de correction de la fonction objective. Ce paramètre est lu sur la carte OPTIMIS1

XMIN : Valeur minimum du paramètre lue sur la carte OPTIMIS2

X : Valeur actuelle du paramètre optimisé

XMAX : Valeur maximum du paramètre lue sur la carte OPTIMIS2

Note: La valeur à donner à la variable COFOOB dépend de la grandeur de la fonction F. Si COFOOB n'est pas assez grand la valeur finale du paramètre peut être en dehors des limites imposées. L'utilisation de COFOOB peut entraîner des problèmes de convergence, on peut alors, soit diminuer la valeur de COFOOB, soit ne pas optimiser le paramètre qui nuit à la convergence.

4) CRITERE NS (NOFOB = 4):

La fonction à maximiser est obtenue en calculant le critère NS à partir des débits observés et calculés pour toute la période de simulation. Le critère NS a été retenu par l'Organisation Météorologique Mondiale pour l'intercomparaison des modèles hydrologique [5]. **Ce critère peut être utilisé que si on simule plus d'nn ans.**

$$F = \frac{\sum_{j=1}^{NNE} \sum_{i=1}^{365} (QO_{ji} - \overline{QO}_i)^2 - \sum_{j=1}^{NNE} \sum_{i=1}^{365} (QO_{ji} - QC_{ji})^2}{\sum_{j=1}^{NNE} \sum_{i=1}^{365} (QO_{ji} - \overline{QO}_i)^2}$$

$$F = 1 - \frac{\sum_{j=1}^{NNE} \sum_{i=1}^{365} (QO_{ji} - QC_{ji})^2}{\sum_{j=1}^{NNE} \sum_{i=1}^{365} (QO_{ji} - \overline{QO}_i)^2} \qquad (7)$$

où:

$\overline{QO}_i$: moyenne du jour i des débits observés

Le critère NS varie de $-\infty$ à $+1$. Nous avons une simulation parfaite pour NS = 1. Un NS négatif indique qu'il est préférable d'utiliser la moyenne journalière $\overline{QO}_i$. Le programme BOTM minimisant la fonction objective on doit utiliser -F pour trouver la valeur optimale des paramètres.

Si le paramètre COFOOB lu sur la carte OPTIMIS1 est supérieur à zéro la fonction objective est modifiée si la valeur des paramètres optimisés dépasse les limites que l'on a fixées sur les cartes PAROPTxx. La modification est faite de la façon suivante:

$$F' = F - \sum_{j=1}^{NBPAR} MAX\ [(COFOOB \times (XMIN_j - X_j), 0.0] - \sum_{j=1}^{NBPAR} MAX\ [(COFOOB \times (X_j - XMAX_j), 0.0] \quad (8)$$

où:

F' : Fonction objective modifiée

COFOOB : Paramètre de correction de la fonction objective. Ce paramètre est lu sur la carte OPTIMIS1

XMIN : Valeur minimum du paramètre lue sur la carte OPTIMIS2

X : Valeur actuelle du paramètre optimisé

XMAX : Valeur maximum du paramètre lue sur la carte OPTIMIS2

Note: La valeur de la fonction F étant généralement entre 0.0 et 1. La valeur à donner à COFOOB est d'environ 10. L'utilisation de COFOOB peut entraîner des problèmes de convergence, on peut alors, soit diminuer la valeur de COFOOB, soit ne pas optimiser le paramètre qui nuit à la convergence.

CARTES DE DONNÉES

La mise en opération du programme CEQUEOPT nécessite la lecture d'une carte obligatoire suivie d'un certain nombre de cartes induites et finalement les cartes de données du modèle CEQUEAU.

Toutes les cartes du modèle comportent un mot-clé de dix caractères au maximum, perforé sur les dix premières colonnes et justifié à gauche. Seuls les huit premiers caractères sont vérifiés par le programme. Les 70 colonnes restantes sont utilisées pour introduire les données nécessaires à l'optimisation.

La première carte lue, par le programme d'optimisation, a pour mot-clé OPTIMIS1. Cette première carte est obligatoire et donne les informations générales relatives à l'optimisation que l'on veut effectuer. Le tableau 2 donne le format de lecture et la description des variables lues. La carte OPTIMIS2 est la deuxième carte obligatoire et donne le numéro des paramètres à optimiser tel que donné au tableau 1. Cette deuxième carte est suivie de NBPAR cartes induites, où NBPAR est le nombre de paramètres que l'on désire optimiser. Ces cartes induites ont pour mot-clé PAROPTxx ou xx est le numéro du paramètre. Les cartes induites donnent les informations de chaque paramètre que l'on veut optimiser. Le format et la description des données lues sur les cartes induites sont donnés au tableau 4.

Les cartes induites PAROPTxx sont suivies des cartes du modèle CEQUEAU. L'ordre de ces cartes et la description des variables lues sont donnés au chapitre 3 du manuel d'utilisation du modèle CEQUEAU [1].

Toutes les cartes du modèle CEQUEAU peuvent être lues mais elles ne sont pas toujours prises en considération. Par exemple on peut faire lire la carte GRAPHIQUE par le programme CEQUEOPT mais aucun graphique ne sera imprimé.

Le programme **EPAR** permet de préparer les cartes nécessaires pour faire fonctionner le programme d'optimisation. Le fichier de description des cartes et des champs des variables étant nommé EPAROPT.HLP **on exécute le programme, en faisant EPAR OPT.**

Le programme EPAR peut-être installé avec le programme EPINSTAL fournit sur la disquette contenant les programmes.

REMARQUES

L'utilisation du programme CEQUEOPT est simple et permet d'obtenir rapidement les valeurs des paramètres qui minimisent les différences entre les débits observés et les débits calculés pour la période d'optimisation. Cependant pour s'assurer que les valeurs des paramètres permettent aussi d'obtenir des résultats satisfaisants sur d'autres périodes il est important de garder une période qui sera utilisée pour la vérification.

Le programme modifie la valeur des paramètres pour minimiser les erreurs, même si la valeur des paramètre n'a pas de sens physique. Par exemple, prenons un cas hypothétique, si on optimise le taux de fonte en forêt (TFC) on s'attend à trouver une valeur positive alors que le programme peut converger vers une valeur négative si les erreurs de simulation diminuent. Dans ce cas il est évident que les résultats n'ont pas de sens et que le programme "corrige" soit des erreurs sur les données d'entrée ou des erreurs sur les valeurs utilisées pour les autres paramètres. On doit, dans ce cas, trouver la cause de l'erreur et reprendre l'optimisation, où fixer une valeur, qui a un sens physique, au paramètre. Même si tous les paramètre n'ont pas une limite physique aussi facile à déterminer il est important de s'interroger sur la valeur obtenue pour chaque paramètre optimisé.

RÉFÉRENCES

[1] MORIN, G., FORTIN, J.P., LARDEAU, J.P.,SOCHANSKA, W., PAQUETTE, S. (1981). Modèle CEQUEAU: manuel d'utilisation. INRS-Eau rapport scientifique no 93, 449 p.

[2] POWELL, M.J.D. (1964). An efficient method for finding the minimum of a function of several variables without calculating derivatives. Computer j., 7, 155-162.

[3] KUESTER, J.L., MIZE, J.H. (1973). Optimisation Techniques with Fortran. McGRAW-HILL BOOK COMPANY.

[4] NASH, J.E. and SUTCLIFFE, J.V. (1970). Riverflow forecasting through conceptual model. Journal of Hydrology, 10: 282-290.

[5] WMO (1986). Intercomparison of models of snowmelt runoff, Operational Hydrology Report No 23 WMO-No 646. Secretariat of World Meteorological Organization Geneva, Switzerland.

TABLEAU 1 Liste des paramètres que l'on peut optimiser.

Numéro	Nom	Description
1	STRNE	Seuil de transformation pluie-neige (°C).
2	TFC	Taux potentiel de fonte en forêt (mm/°C/jour).
3	TFD	Taux potentiel de fonte en clairière (mm/°C/jour).
4	TSC	Seuil de température de fonte en forêt (°C).
5	TSD	Seuil de température de fonte en clairière (°C).
6	TTD	Coefficient de déficit calorifique. L'optimisation de ce paramètre provoque l'arrêt du programme parce qu'il ne modifie pas suffisament la fonction objective.
7	TTS	Température du mûrissement du stock de neige (°C).
8	CIN	Coefficient d'infiltration dans le réservoir NAPPE. Le coefficient doit être le même pour tous les carreaux entiers.
9	CVMAR	Coefficient de vidange du réservoir LACS et MARAIS.
10	CVNB	Coefficient de vidange basse du réservoir NAPPE.

11	CVNH	Coefficient de vidange haute du réservoir NAPPE.
12	CVSB	Coefficient de vidange basse du réservoir SOL.
13	CVSI	Coefficient de vidange intermédiaire du réservoir SOL.
14	XINFMA	Infiltration maximale (mm/jour).
15	HINF	Seuil d'infiltration du réservoir SOL vers le réservoir NAPPE (mm).
16	HINT	Seuil de vidange intermédiaire du réservoir SOL (mm).
17	HMAR	Seuil de vidange du réservoir LACS et MARAIS (mm).
18	HNAP	Seuil de vidange supérieure du réservoir NAPPE (mm).
19	HPOT	Seuil de prélèvement de l'eau à taux potentiel, par évapotranspiration (mm).
20	HSOL	Hauteur du réservoir SOL (mm).
21	HRIMP	Lame d'eau nécessaire pour que débute le ruissellement sur les surfaces imperméables (mm).
22	COEP	Coefficient de correction des précipitations annuelles en fonction de l'altitude (mm/mètre/an). Pour optimiser ce paramètre les cartes CORPREC (voir manuel d'utilisation du modèle CEQUEAU [1] section 3.4.8) ne doivent pas être utilisées.

23	EVNAP	Fraction de l'évapotranspiration prise dans le réservoir NAPPE (de 0.0 à 1.0).
24	TRI	Fraction de surface imperméable des carreaux entiers (de 0.0 à 1.0). La fraction doit être la même pour tous les carreaux.
25	XAA	Exposant de la formule de Thornthwaite.
26	XIT	Valeur de l'index thermique de Thornthwaite.
27	COET	Correction des températures en fonction de l'altitude (°C/1 000 m).
28	EXXKT	Paramètre d'ajustement des coefficients de transfert d'un carreau partiel à l'autre, pour le pas de temps d'une journée.

TABLEAU 2 Carte obligatoire OPTIMIS1.

1 10	15	20	25	30	35	40	45	55	65	80
OPTIMIS1	NOFOB	NOSTOP	NOSTO2	IPRINT	IPTOT	NBSIM	MAXIT	ESCALE	COFOOB	
A10	I5	I5	I5	I5	I5	I5	I5	F10.2	F10.2	

Variable	Colonnes	Signification
NOFOB	11-15	Code pour le choix de la fonction objective: 1 = somme des carrées des différences; 2 = critère NTD; 3 = somme des différences absolues; 4 = critère NS;
NOSTOP	16-20	Numéro de station à optimiser. NOSTOP doit être compris entre 1 et NBSH (nombre de stations hydrométriques réelles. Voir DOT(4) du DOT initial, tableau 1.12 du manuel d'utilisation du modèle CEQUEAU);
NOSTO2	21-25	Pas utiliser présentement
IPRINT	26-30	Code d'impression des valeurs des paramètres et de la fonction objective après chaque recherche individuelle sur un paramètre ou après chaque itération seulement; 1 = impression après chaque paramètre; 2 = impression après chaque itération;

IPTOT	31-35	Code pour impression, après chaque simulation, de la fonction objective et des valeurs des paramètres; 0 = pas d'impression; 1 = impression;
NBSIM	36-40	Nombre maximum de simulations que l'on désire faire. Si le nombre maximum de simulations est atteint avant que l'optimisation soit terminée le programme est arrêté;
MAXIT	41-45	Nombre maximum d'itérations que l'on désire faire. Une itération est une séquence complète de recherche individuelle sur les NBPAR paramètres;
ESCALE	46-55	Facteur pour augmenter le pas de la recherche de l'optimum individuel des paramètres. Pour une simulation la valeur d'un paramètre sera augmentée au maximum de DELTA où: DELTA = ESCALE * E(I) E(I) = limite de convergence imposée au paramètre tel que fixé sur la carte OPTIMIS2
COFOOB	56-65	Coefficient permettant la modification de la fonction objective pour introduire une contrainte aux paramètres à optimiser. Ce coefficient permet d'augmenter la fonction objective si la valeur d'un paramètre dépasse sa limite inférieure (XMIN) ou sa limite supérieure (XMAX) telles que fixées sur la carte OPTIMIS2.

TABLEAU 3 Carte obligatoire OPTIMIS2.

1 10	13	16	19	22	25	80
OPTIMIS2	NOOPT(I)					
A10	I3	I3	I3	I3	I3	

Variable	**Colonnes**	**Signification**
NOOPT(I)	11-13	Numéro du paramètre que l'on désire optimiser. Voir le tableau 1 pour la liste des paramètres que l'on peut optimiser.
	14-16	
	etc.	

TABLEAU 4 Carte induite PAROPTxx.

1 10 15 25 35 45 55 65 80

PAROPTxx	NUMOP	PNOM	XMIN	X	XMAX	E	
A10	I5	A10	F10.4	F10.4	F10.4	F10.4	

Ces cartes contiennent les informations relatives aux paramètres à optimiser, xx est le numéro du paramètre il est compris entre 1 et 28. Il doit y avoir NBPAR cartes et elles doivent être introduites immédiatement après la carte OPTIMIS2 et avant la carte SIMULATION. L'ordre des cartes impose l'ordre d'optimisation des paramètres.

Variable	**Colonnes**	**Signification**
NUMOP	11-15	Numéro du paramètre à optimiser NUMOP doit être compris entre 1 et 32. Les paramètres que l'on peut optimiser sont listés au tableau 1;
PNOM	16-25	Nom du paramétre que l'on désire optimiser. Le nom et le numéro du paramètre doivent correspondre tel qu'indiqué au tableau 1, sinon un message d'erreur est imprimé et le programme s'arrête.
XMIN	26-35	Limite inférieure que l'on désire imposer au paramètre. Le programme d'optimisation trouve normalement la valeur optimale du paramètre. Si la valeur trouvée est inférieure à XMIN et que le coefficient COFOOB de la carte OPTIMIS1 est supérieur à zéro la fonction objective est augmentée pour forcer le

		programme à revenir à une valeur supérieure à XMIN. Si le coefficient COFOOB est égal à zéro XMIN est ignoré.
X	36-45	Valeur de départ du paramètre à optimiser. L'essai de plusieurs valeurs de départ peut être nécessaire pour trouver l'optimum réel.
XMAX	46-55	Limite supérieure que l'on désire imposer au paramètre. Voir XMIN ci-dessus.
E	56-65	Limite de convergence du paramètre. La convergence utilisée 0.1 * E. Le pas maximum pour la recherche individuelle de la valeur optimal d'un paramètre sera de ESCALE * E. La valeur de ESCALE est lue sur la carte OPTIMIS1 et est la même pour tous les paramètres.